

# Metropolis-Algorithmus

Wahr: impenetrable samples

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i)$$

Metropolis:

- Start mit einer Konfiguration  $x_1$
- Wähle die folgende Konfiguration auf Basis eines Markov-Prozesses
- Dabei werde die Übergangswahrsch.  $w_{ij}$  so gewählt,

dass

$$\lim_{M \rightarrow \infty} P = P_{\text{eq}}(x_i) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x_i)}$$

$M, V, T$   
Erschuld

$$w_{ij} P_{\text{eq}}(x_i) = w_{ji} P_{\text{eq}}(x_j)$$

Detailed Balance  $\Leftrightarrow$  streng Definitiv der Gleichheit wieder

$$\frac{w_{ij}}{w_{ji}} = \frac{P_{\text{eq}}(x_j)}{P_{\text{eq}}(x_i)} = e^{-\beta(H(x_j) - H(x_i))} = e^{-\beta \Delta H}$$

Es geht also nur das Karhällers der Boltzmannkette ein, Zustandssumme ~~kurze~~ sich raus!

Was ist  $w_{ij}$  selbst?

Es gibt versch. Möglichkeiten!

Allgemeiner Ansatz

$$w_{ij} = \alpha_{ij} P_{ij}^{\text{acc}}$$

$\alpha_{ij}$  : Wahrsch. für den Testschritt  
 $x_i \rightarrow x_j$

$P_{ij}^{\text{acc}}$  : acceptance probability,  
(Akzeptanzwahrsch.)

"Metropolis-Lösung" :

$$P_{ij}^{\text{acc}} = \begin{cases} 1, & \text{falls } P_{eq}(x_j) \geq P_{eq}(x_i) \\ \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}, & \text{sonst} \end{cases}$$

Zusammenfassend:

$$P_{ij}^{\text{arc}} = \min\left(1, \frac{P_{\text{eq}}(x_j)}{P_{\text{eq}}(x_i)}\right)$$

beachte:  $\frac{P_{\text{eq}}(x_j)}{P_{\text{eq}}(x_i)} = e^{-t(H(x_j) - H(x_i))}$

$\Rightarrow$  falls  $x_j$  mit einem geringeren Energie  
verknüpft ist, dann ~~ist~~ ist  $P_{ij}^{\text{arc}} = 1$

Beachte auch

Die Matrix  $\alpha$  mit Elementen  $\alpha_{ij}$   
heißt "underlying matrix of the Markov chain"

sog. "stochastische Matrix"

Anforderungen:  $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$  = "Symmetrie"

$$\sum_j \alpha_{ij} = 1$$

Erhalten der  
Wahrsch.

Zeige nun, dass die Metropolis-Lösung (alsärl. dir.)  
 Bedingung  $w_{ij} P_{eq}(x_i) = w_{ji} P_{eq}(x_j)$  und  $\sum_i w_{ji} = 1$  erfüllt  
 (Detailed balance)

betrachte 3 Fälle

a)  $P_{eq}(x_i) = P_{eq}(x_j)$

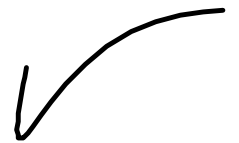
(d.h.  $H(x_i) = H(x_j)$ )  
 Energie ändert sich nicht!

Erinnere:  $w_{ij} = \alpha_{ij} P_{ij}^{acc}$

hier:  $P_{ij}^{acc} = 1 = P_{ji}^{acc}$

aus  $\circledast$   $w_{ij} = \alpha_{ij} = \alpha_{ji} = w_{ji}$

$$\sum_i w_{ji} = \sum_i \alpha_{ji} \left( = \sum_i \alpha_{ij} \right) = 1$$



und

$$w_{ij} P_{eq}(x_i) = w_{ji} P_{eq}(x_j) \quad \checkmark$$

b) sei  $P_{eq}(x_j) < P_{eq}(x_i)$

$$(also H(x_j) > H(x_i))$$

$$\begin{aligned}
 \text{ans } \textcircled{*} : W_{ij} &= \alpha_{ij} P_{ij}^{arc} = \alpha_{ij} \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)} \quad \leftarrow \text{Metropolis loci} \\
 W_{ji} &= \alpha_{ji} \frac{P_{ji}^{arc}}{1} = \alpha_{ji}
 \end{aligned}$$

$$\sum_i W_{ji} = \sum_i \alpha_{ji} = 1 \quad \checkmark$$

$$\begin{aligned}
 \frac{W_{ij}}{W_{ji}} &= \frac{\alpha_{ij} \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}}{\alpha_{ji} \cdot 1} & \alpha_{ij} &= \alpha_{ji} \\
 &= \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)} & &
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C) \text{ sei } P_{eq}(x_j) > P_{eq}(x_i) &\Rightarrow W_{ij} = \alpha_{ij} \\
 \text{analog zu b) !} & W_{ji} = \alpha_{ji} \frac{P_{eq}(x_i)}{P_{eq}(x_j)}
 \end{aligned}$$

# IV, Z.S., Metropolis für Spinsysteme

Betrachte Ising-System in Kanon. Enst.

$$\text{d.h. } \underline{X} = \{s_1, \dots, s_N\}$$

↑  
Stokaste  
Variablen!

$$s_i = \pm 1, \quad i = 1, \dots, N$$

$$H = -J \sum_{i=1}^N s_i \sum_{j \in \mathcal{Z}_i} s_j$$

Z.B.  $J > 0$   
ferromagnet.

Summe über die nächsten Nachbarn  
(dimensionsabhängig)  
2 Nachbarn in  $D=1$  — Rechenweg  
4 " in  $D=2$  (Quadratgitter)

Praktisch :

1) Wähle Anfangskonfiguration für die  $N$  Spins

2) Wähle einen Spin  $s_i$  aus

(Zwei Möglichkeiten)

Entweder alle der Reihe nach oder  
Zufällig so, dass alle mit gleicher Wahrsch.  
daran kommen!)

3) Berechne die Größe  $\Delta H = H^{\text{neu}} - H^{\text{alt}}$ , die sich ergibt, wenn man  $S_i$  festfreie umdreht ("flipp")

#### 4) Metropolis - Entscheidung

$$\bullet \Delta H \leq 0 \Leftrightarrow \frac{P_{\text{eq}}(x^{\text{neu}})}{P_{\text{eq}}(x^{\text{alt}})} \geq 1$$

$$\Rightarrow P_{\text{alt} \rightarrow \text{neu}}^{\text{acc}} = 1$$

$\Rightarrow$  akzeptiere den "Move", d.h. ändere die Gesamtkonfiguration

$$\bullet \Delta H > 0 \Rightarrow P_{\text{alt} \rightarrow \text{neu}}^{\text{acc}} = \frac{P_{\text{eq}}(x^{\text{neu}})}{P_{\text{eq}}(x^{\text{alt}})} = e^{-\beta \Delta H}$$

Erzeuge Zufallszahl

$$\xi \in [0, 1]$$

gleichförmige Verteilung

falls  $\xi < e^{-\beta \Delta H}$  . Akzeptiere den Move

$$\int > e^{-\beta \mathcal{H}}$$

: Ableitung des Kern,  
d.h. alle Konfigurationen  
+ all Rest erhalten!

Illustration.

Sei z.B.  $e^{-\beta \mathcal{H}} = 0.8$

Die Wahsch. eine Zufallszahl  $\leq 0.8$  zu erzeugen  
ist gerade 80%!

5) Wiederhole 2) mit dem  
nächsten Spin

⋮ Schritte !

Bemerkung

i) Berechnung von Mittelwert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i)$$

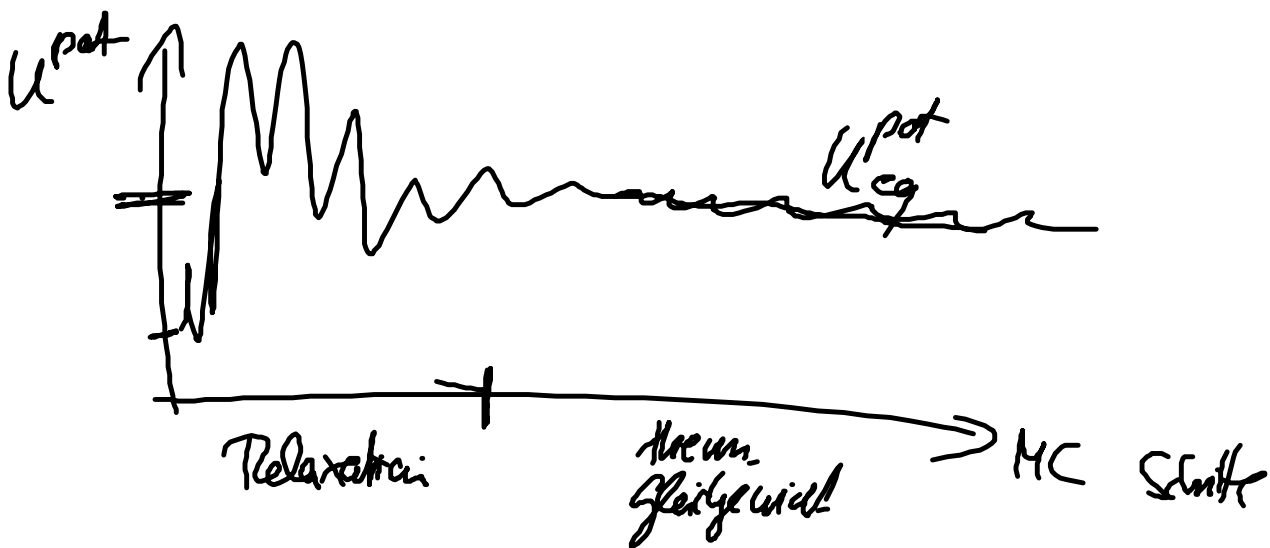
M: Zahl der MC-Schritte, nach  
Metropolis generiert.



Dabei müssen (nach "Equilibrierung"  
( $\rightarrow$  später))

alle Schritte, auch abgedeckt  
einbezogen werden, da auch solche Schritte  
ein stat. Gewicht haben !!)

- (i) Praktisch beginnt ~~mit~~ man mit der Mittelung erst  
nach "Equilibrierung" (Relaxation ins Gleichgewicht)  
— d.h. dann, wenn das System die "Einstellung"  
an die Anfangskonfiguration verloren hat!



(ii) Auch im Gleichgewicht bezieht man meist nicht jeden Schritt in drei Hitzeln ein, sondern z.B. nur jeden 10. Schritt (dabei aber auch dann, wenn er abgelehnt wurde)

⇒ Vermeidung von Gedächtniseffekt

## IV. Z.6. MC für kontinuierliche Systeme

Zunächst: Einfaches Fluid ohne innere Freiheitsgrade (Kugeln)

### MC-Schritt:

- Auswahl eines Teilchens (Zufällig oder der Reihe nach)
- Verschiebung dieses Teilchens

$$N_i^{\text{alt}} \longrightarrow N_i^{\text{neu}} = N_i + \underline{d}$$

Dabei ist der Verschiebungsvektor d eines Zufallsvektors aus einem ~~1D-VE~~ Verschiebungsvektor

Karlschritt:

Zu Beginn der Simulation

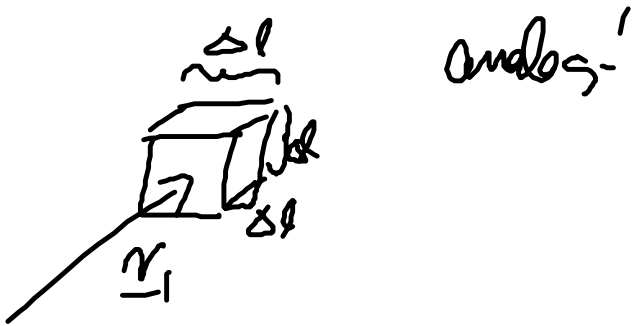
Wähle feste Länge  $\Delta l = (\Delta U)^{\frac{1}{3}}$

kleine des  
Veränderungswertes

$$\left( N_i^{\text{neu}} \right)_X = \left( N_i^{\text{alt}} \right)_X + \frac{\Delta l}{2} (1 - 2\eta_X)$$

$$\left( N_i^{\text{neu}} \right)_Y, \left( N_i^{\text{neu}} \right)_Z$$

$\eta_X \in [0, 1]$   
Zufallszahl



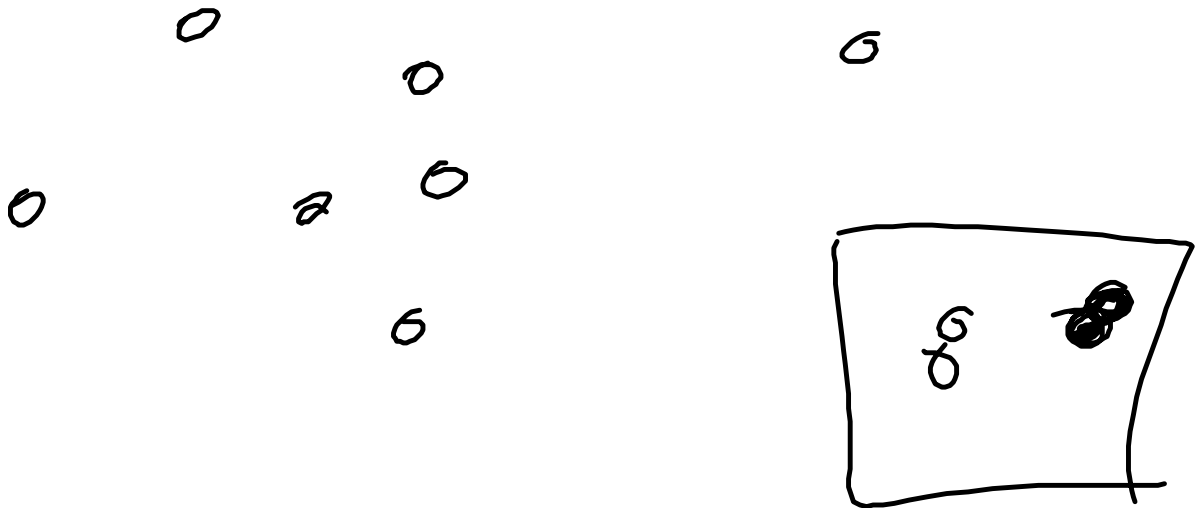
Akzeptanzkriterium:

$$P_{ij}^{\text{acc}} = \begin{cases} 1, & \Delta U < 0 \\ e^{-\beta \Delta U}, & \Delta U > 0 \end{cases}$$

$$\text{hier } \Delta U = H_{\text{neu}}^{\text{pot}} - H_{\text{alt}}^{\text{pot}}$$

$$U^{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} u(r_{ij})$$

Zur Wahl der Anfangskonfiguration für flüch-  
 verduichtet System (Gas): Verteile die Anfangspartikel zufällig



dichtes Fluid.

Wähle Konfiguration auf Gitter, z.B. fcc

~~Die~~ Durch Vergleich der Endergebnisse mit versch.  
 Anfangskonfiguration kann man die Ergadzkeit des  
 Algorithmus überprüfen

# Kontinuierliche Systeme mit einem Freiheitsgrad

z.B. Stäbe



Charakterisierung der Konfiguration:  $(\underline{N}_1, \dots, \underline{N}_N, \underline{u}_1, \dots, \underline{u}_N)$

"Einbauen" in die MC Simulation

Jeder MC Schritt ist entweder Translation oder Rotation (jeweils mit Wkchst. 50%)

(Erinnerung:

$$\sum_j \alpha_{ij} = 1$$

Elemente der stochast. Matrix, die die Wkchst. für die Test statt ergibt..")

Praktische Ausföhrung der Potahci

Ziel  
Zielsetzung auf der Ebene

$$\underline{u}_i^{\text{alt}} \rightarrow \underline{u}_i^{\text{neu}} = \frac{\underline{u}_i^{\text{alt}} + \gamma \underline{v}}{\|\underline{u}_i + \gamma \underline{v}\|}$$



$\gamma$  wird im Laufe der Simulation adaptiert so dass ca. 40-60% der Schritte akzeptiert werden.